



TITLE:

転位の伝播とカオティックな破壊 (高次元系II,カオスとその周辺,研究会報告)

AUTHOR(S):

後藤, 章

CITATION:

後藤, 章. 転位の伝播とカオティックな破壊(高次元系II,カオスとその周辺,研究会報告). 物性研究 1986, 46(2): 286-287

ISSUE DATE:

1986-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91982>

RIGHT:

転位の伝播とカオティックな破壊

京大・理 後 藤 章

転位の運動の最も簡単な1次元模型であるFrenkel-Kontorova 模型を用いて、計算機上で、そのダイナミックスを実現し、いくつかの定性的な観察を行った。

§ 1. 模型および動機

一様な外部応力 σ をかけられた Frenkel-Kontorova 模型 (バネの定数 α , パイエルス・ポテンシャルの強さ A , 格子定数 a) の運動方程式は、非線形差分微分方程式系

$$\ddot{X}_k = X_{k+1} - 2X_k + X_{k-1} - B \sin 2\pi X_k + C \quad (k = 1, 2, \dots, N)$$

となる。ここに $B = \frac{2\pi A}{\alpha a^2}$, $C = \frac{\sigma}{\alpha a}$ で、それぞれ、バネの弾性力に対する、非線形力の強さと外部応力の大きさを表す2つのパラメータであり、 $B-C$ 平面上で、系の種々の運動形態が記述される。

$C = 0$ で、この模型は空間のみ離散化したサイン・ゴールドン方程式となり、連続体極限でソリトン解を持つが、転位の描像では、それは幅の広い転位がパイエルス・ポテンシャルを粗視化して、無輻射で運動している状態に対応しており、興味はない。ここで問題とするのは、結晶が格子であることから生ずる離散効果であり、これは幅の狭い転位が比較的強いパイエルス・ポテンシャルをよく見ながら、音波を輻射・吸収しながら、ぎこちなく運動する状態に対応している。離散効果と非線形性に注目することにより、運動の形態はソリトンをこえてはるかに豊かなものとなる。

不純物等、粘性の効果は入れず、多自由度のハミルトン系として取扱う。転位の運動は、多原子が協力して (あるいは競争して) 起こす集団運動と考えられるが、離散効果として生ずる音波の座標と転位の座標を分離する一般的な方法が確立されていない現在、計算機で転位と音波の相互作用を観察することは重要である。

§ 2. 実験の説明と観察事実

両端を固定した50個の原子で、2原子間隔の幅をもつ狭い転位を、静止状態を初期条件として、パラメータ領域

$$0.1 < B < 1.1, \quad 0.03 < C < 0.27$$

で運動を観察した。典型的な時間のキザミは 0.01 で端の影響が無視できる 4000 ステップまで追跡し、その範囲で、エネルギーの変動は 0.1% 以内におさえることができた。

$B = 0.8$, $C = 0.2$ での転位の運動の例を図 1 に示す。一つの曲線は、横方向が原子の位置、縦方向がその変位で、時間発展に従って斜め方向に描いてある。

次に、表 1 で、 $B-C$ 平面での相図を示す。○の中の数字は速度の目安である。

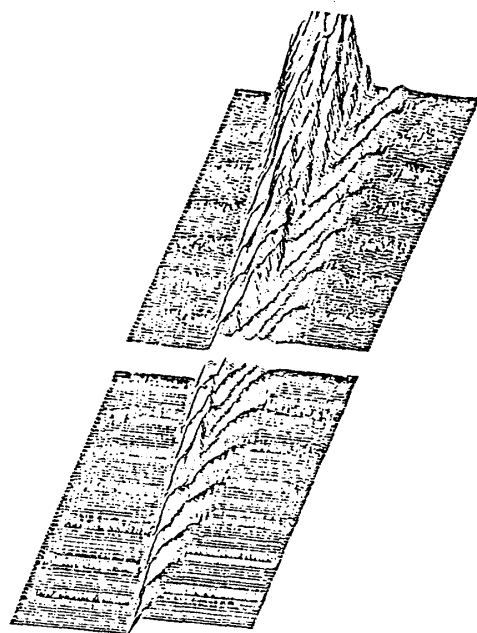
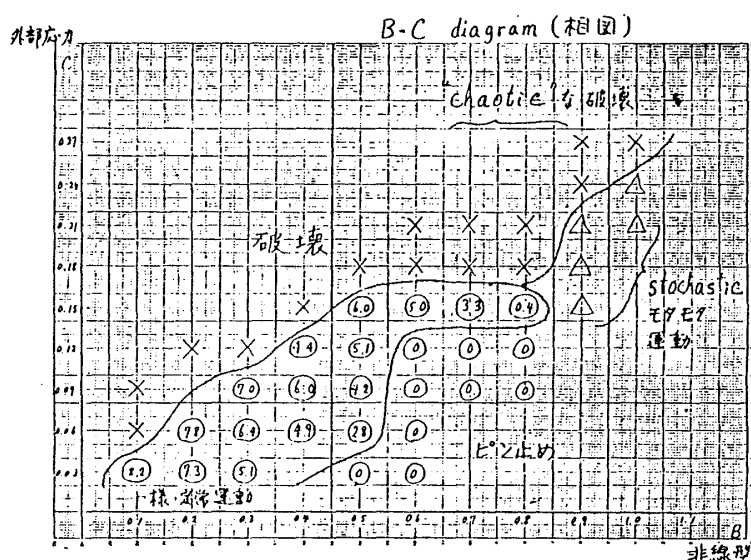


図 1

表 1



§ 3. まとめと課題

観察事実の幾つの特徴をまとめると、

- ① 外部応力と、離散効果のみによる音波輻射がバランスした、一様な定常運動が存在しており、ソリトン解の残骸とみられる。
- ② 離散効果の強く現れる領域では pulsating motion が典型的で、back flow との相互作用が顕著となる。
- ③ 外部応力を強くすると、非線形領域では転位にエネルギーが集中し、爆発しながら運動する。とくに離散効果の大きな領域では、カオティックになるとみられる。

今後の課題として、とくに③の現象について、定量的な解析を進めたい。そのためには系を 100 個以上の原子に拡張する必要があると感じている。また音波の吸収・輻射の問題も今後の課題とする。